

УДК по дисциплине «Методы оптимизации» (160403) (519.677 Решения задач математического анализа и прикладных задач) для специальности 1604030065.

Рецензенты: Фурсов Андрей Серафимович - кандидат физико-математических наук;

Шишкина Светлана Ивановна - старший преподаватель.

Вергазова О.Б.

Методы оптимизации. Прямые методы и методы, использующие производные функций

Методические указания к выполнению домашнего задания. М.: МГТУ имени Н.Э. Баумана, 2012. 25 с.

Данные методические указания призваны помочь студентам Приборостроительного факультета в освоении курса оптимизации. В методических указаниях приведены основные теоретические сведения по методам минимизации унимодальных функций и алгоритмы таких методов. Подробно рассмотрены решения типовых задач домашнего задания и предложены задачи для самостоятельного решения.

Вергазова Ольга Бухтияровна

Методы оптимизации. Прямые методы и методы, использующие производные функций

(С) 2012 МГТУ имени Н.Э. Баумана

Содержание

1. Предварительные сведения
2. Прямые методы:
 - 2.1. Метод перебора.
 - 2.2. Метод поразрядного поиска.
 - 2.3. Методы исключения отрезков:
 - 2.3.1. Первый метод дихотомии (деления отрезка пополам).
 - 2.3.2. Метод золотого сечения.
 - 2.3.3. Второй метод дихотомии (деления отрезка пополам).
3. Методы, использующие производные функции:
 - 3.1. Метод средней точки.
 - 3.2. Метод хорд.
 - 3.4. Метод Ньютона .
4. Задачи для самостоятельного решения.
5. Литература.

1.Предварительные сведения

В данном пособии рассматривается простейшая математическая модель оптимизации, в которой целевая функция зависит от одной переменной, а допустимым множеством является отрезок вещественной оси:

$$f(x) \rightarrow \min, \text{ где } a \leq x \leq b.$$

Для решения задач оптимизации функции $f(x)$ на отрезке $[a; b]$ применяют, как правило, приближенные методы, позволяющие получить результат с необходимой точностью, вычисляя значения функции $f(x)$ и, может быть, ее производных в конечном числе точек отрезка $[a; b]$.

Число x^* , принадлежащее множеству U , называется **точкой глобального (абсолютного) минимума** или просто **точкой минимума** функции $f(x)$ на множестве U , если $f(x^*) \leq f(x)$ для всех x из U .

Значение $f^* = f(x^*) = \min_U f(x)$ называют **глобальным (абсолютным) минимумом** или просто **минимумом** функции $f(x)$ на множестве U .

Число x^* , принадлежащее множеству U , называется **точкой локального минимума** функции $f(x)$, если $f(x^*) \leq f(x)$ для всех x из U , достаточно близких к x^* , т.е. если существует $\varepsilon > 0$ такое, что это неравенство выполняется для любого x из множества U , таких, что $|x - x^*| < \varepsilon$.

Будем рассматривать функции, у которых каждый локальный минимум является одновременно и глобальным. Этим свойством обладают **униmodalные функции**.

Функция $f(x)$ называется **униmodalной на отрезке $[a; b]$** , если она непрерывна на $[a; b]$ и существуют числа α и β , $a \leq \alpha \leq \beta \leq b$, такие, что:

- 1) если $a < \alpha$, то на отрезке $[a; \alpha]$ функция монотонно убывает;
- 2) если $\beta < b$, то на отрезке $[\beta; b]$ функция монотонно возрастает;
- 3) при $x \in [\alpha; \beta]$ $f(x) = f^* = \min f(x)$ на отрезке $[a; b]$.

2. Прямые методы

Методами прямого поиска называются методы минимизации функции одного переменного, в которых используют только значения функции в точках рассматриваемого промежутка. Такие методы используются в тех случаях, когда функция не является дифференцируемой или вычисление производных затруднено.

Среди методов прямого поиска можно выделить следующие две группы:

1) методы **пассивного поиска**, когда все N точек x_i , где $i=1, \dots, N$, в которых будут вычислены значения функции, выбирают заранее (до вычисления значений функции в этих точках);

2) методы **последовательного поиска**, когда точки x_i выбирают последовательно, используя значения функции, вычисленные в предыдущих точках.

2.1.Метод перебора

Метод перебора или равномерного поиска является простейшим из прямых методов оптимизации пассивного поиска и состоит в следующем.

Разобьем отрезок $[a; b]$ на n равных частей точками деления

$x_i = a + i(b-a)/n$, $i=0, \dots, n$. Вычислив значения функции $f(x)$ в точках x_i , точку x_m , $0 \leq m \leq n$, для которой

$$f(x_m) = \min f(x_i), \text{ где } 0 \leq i \leq n.$$

Далее, положим $x^* \approx x_m, f^* \approx f(x_m)$.

Замечания:

1. Погрешность определения точки минимума x^* функции $f(x)$ методом перебора не превосходит величины $\varepsilon_n = (b-a)/n$.

2. Чтобы обеспечить требуемую точность ε определения точки x^* , число

отрезков разбиения n необходимо выбрать из условия

$$n \geq (b-a) / \varepsilon.$$

3. Пусть отрезок $[a; b]$ был разбит на $n=N-1$ частей, и достигнутая точность определения x^* составила $\varepsilon_n = \varepsilon_{N-1} = (b-a)/(N-1)$. Поэтому точность решения $\varepsilon(N)$, которую обеспечивает метод перебора в результате N вычислений $f(x)$, будет $\varepsilon_{(N)} = (b-a)/(N-1)$.

Пример 1. Метод перебора.

Решить задачу $f(x) = x^4 + e^{-x} \rightarrow \min$, где $0 \leq x \leq 1$, с точностью до $\varepsilon = 0,1$.

Функция $f(x)$ унимодальна на отрезке $[0; 1]$. Найдем число n отрезков разбиения: $n \geq (1-0)/0,1 = 10$, т.е. можно взять $n = 10$.

Вычислим значения $f(x_i)$, где $x_i = 0, \dots, 10$ и запишем их в таблицу 1.

Таблица 1

x_i	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1
$f(x_i)$	1	0,9	0,82	0,75	0,7	0,67	0,68	0,74	0,86	1,06	1,37

В таблице 1 красным цветом выделено минимальное из вычисленных значений $f(x)$. Таким образом, $x^* \approx 0,5, f^* \approx 0,67$.

2.2. Метод поразрядного поиска

Рассмотрим модификации метода перебора с целью уменьшения количества значений $f(x)$, которые необходимо находить в процессе минимизации.

Во-первых, если оказывается, что $f(x_i) \leq f(x_{i+1})$, то отпадает необходимость вычислять $f(x)$ в точках x_{i+2}, x_{i+3} и т.д., так как $x^* \leq x_{i+1}$.

Во-вторых, разумно было бы сначала определить отрезок, содержащий x^* с небольшой точностью, а затем искать ее на этом отрезке с меньшим шагом дискретизации, повышая точность.

Указанные возможности улучшения метода перебора реализованы в методе поразрядного поиска. В этом методе перебор точек отрезка происходит сначала с шагом $\Delta = x_{i+1} - x_i > \varepsilon$ до тех пор, пока не выполнится условие

$$f(x_i) \leq f(x_{i+1})$$

или пока очередная из этих точек не совпадет с концом отрезка. После этого шаг уменьшается (обычно в 4 раза), и перебор точек с новым шагом производится в противоположном направлении до тех пор, пока значения $f(x)$ снова не перестанут уменьшаться или очередная точка не совпадет с другим концом отрезка и т.д. Описанный процесс завершается, когда перебор в данном направлении закончен, а использованный при этом шаг дискретизации не превосходит ε .

Перед тем, как рассмотреть алгоритм метода поразрядного поиска, сделаем **важное замечание**.

Условимся, что выражение «*положим $a=b$* » означает при программировании выполнение оператора присваивания $a:=b$.

Приведем описание алгоритма метода поразрядного поиска.

ШАГ 1. Выбрать начальный шаг $\Delta = (b - a)/4$. Положить $x_0 = a$. Вычислить $f(x_0)$.

ШАГ 2. Положить $x_1 = x_0 + \Delta$. Вычислить $f(x_1)$.

ШАГ 3. Сравнить $f(x_0)$ и $f(x_1)$. Если $f(x_0) > f(x_1)$, то перейти к шагу 4, иначе – к шагу 5.

ШАГ 4. Положить $x_0 = x_1$ и $f(x_0) = f(x_1)$. Проверить условие $a < x_0 < b$.

Если $a < x_0 < b$, то перейти к шагу 2, иначе – к шагу 5.

ШАГ 5. Проверка на окончание поиска: если $|\Delta| \leq \varepsilon$, то вычисления завершить, полагая $x^* \approx x_0, f^* \approx f(x_0)$, иначе – перейти к шагу 6.

ШАГ 6. Изменение направления и шага поиска: положить $x_0 = x_1, f(x_0) = f(x_1), \Delta = -\Delta/4$. Перейти к шагу 2.

Пример 2. Метод поразрядного поиска.

Решить задачу $f(x) = x^4 + e^{-x} \rightarrow \min$, где $0 \leq x \leq 1, \varepsilon = 0,1$.

Решение.

Начальный шаг $\Delta = 1/4 = 0,25$. Вычисляя последовательно значения $f(x)$ в точках дискретизации с шагом 0,25, получим

x	$0 \rightarrow 0,25 \rightarrow 0,50 \rightarrow 0,75$
$f(x)$	$1,000 > 0,783 > 0,669 < 0,789$

Так как $f(0,50) < f(0,75)$, причем $|\Delta| > \varepsilon$, то поиск x^* продолжаем из начальной точки $x_0 = 0,75$, изменив его направление и уменьшив шаг в 4 раза:

x	$0,4375 \leftarrow 0,5000 \leftarrow 0,5625 \leftarrow 0,6875 \leftarrow 0,7500$
$f(x)$	$0,682 > 0,669 < 0,670 < 0,688 < 0,726 < 0,789$

Так как $|\Delta| = 0,0625 < \varepsilon$, то поиск завершен и $x^* \approx 0,5, f^* \approx 0,67$ (сравните с результатом решения примера 1).

2.3. Методы исключения отрезков

Если для выбора очередной точки вычисления $f(x)$ использовать информацию, содержащуюся в уже найденных значениях $f(x)$, то поиск точки

минимума можно сделать более эффективным, т.е. сократить число определяемых для этого значений.

Один из путей такого более эффективного поиска точки указывает следующее свойство определения унимодальных функций.

Пусть $a < x_1 < x_2 < b$. Сравнив значения $f(x)$ в пробных точках x_1 и x_2 , можно сократить отрезок поиска точки x^* , перейдя к отрезку $[a; x_2]$, если $f(x_1) \leq f(x_2)$, или к отрезку $[x_1; b]$, если $f(x_1) > f(x_2)$ (рис. 1).

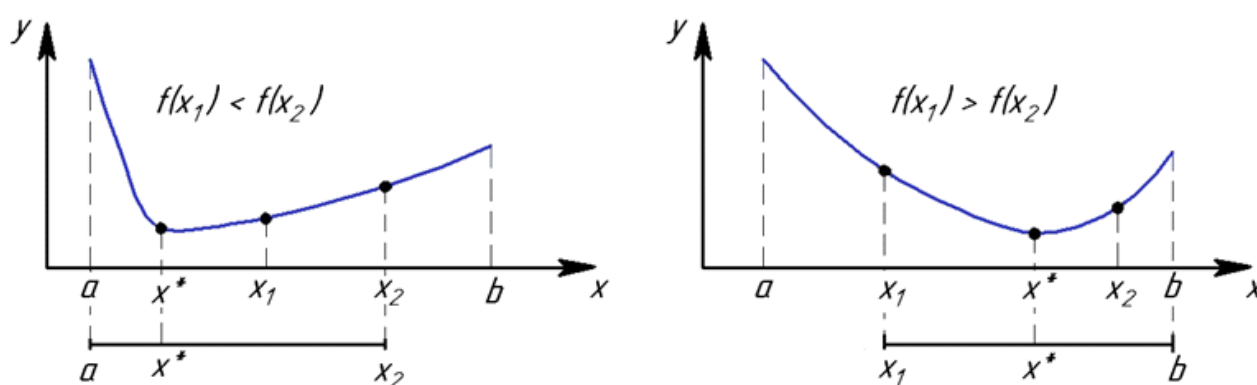


Рис. 1 Уменьшение отрезка поиска точки минимума методами исключения отрезков

Описанную процедуру можно повторить необходимое число раз, последовательно уменьшая отрезок, содержащий точку минимума. Когда длина последнего из найденных отрезков станет достаточно малой, следует положить $x^* \approx x_{\text{сред}}$, где $x_{\text{сред}}$ – одна из точек этого отрезка, например, его середина. Методы минимизации, основанные на этом принципе, называются **методами исключения отрезков**.

Чтобы относительное уменьшение отрезка на каждой итерации не зависело от того, какая из его частей исключается из дальнейшего рассмотрения, пробные точки следует располагать симметрично относительно середины исходного отрезка. В зависимости от способа выбора пробных точек получаются различные методы исключения отрезков.

Рассмотрим метод, в котором точки x_1 и x_2 располагаются близко к середине очередного отрезка $[a; b]$ - *первый метод дихотомии (деления отрезка пополам)*.

2.3.1. Первый метод дихотомии (деления отрезка пополам)

Пусть $x_1 = (b+a-\delta)/2$ и $x_2 = (b+a+\delta)/2$, где $\delta > 0$ – малое число. При этом отношение длин нового и исходного отрезков

$\tau = (b-x_1)/(b-a) = (x_2-a)/(b-a)$ близко к $1/2$, этим и объясняется название метода.

Отметим, что для пробных x_1 и x_2 точек величина $\tau > 1/2$, поэтому указанный выбор пробных точек объясняется стремлением обеспечить максимально возможное относительное уменьшение отрезка на каждой итерации поиска x^* .

В конце вычислений по методу дихотомии в качестве приближенного значения x^* берут середину последнего из найденных отрезков $[a; b]$, убедившись предварительно, что достигнуто неравенство $(b-a)/2 \leq \varepsilon$.

Приведем описание алгоритма метода деления отрезка пополам.

ШАГ 1. Вычислить $x_1 = (b+a-\delta)/2$ и $x_2 = (b+a+\delta)/2$. Вычислить $f(x_1)$ и $f(x_2)$.

ШАГ 2. Сравнить $f(x_1)$ и $f(x_2)$. Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то перейти к отрезку $[a; x_2]$, положив $b = x_2$, иначе – к отрезку $[x_1; b]$, положив $a = x_1$.

ШАГ 3. Найти достигнутую точность $\varepsilon_n = (b-a)/2$. Если $\varepsilon_n > \varepsilon$, то перейти к следующей итерации, вернувшись к шагу 1. Если $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, то завершить поиск x^* , перейдя к шагу 4.

ШАГ 4. Положить $x^* \approx x_{\text{сред}} = (b+a)/2$.

Замечания:

1) Число выбирается из условия с учетом следующих соображений:

а) чем меньше δ , тем больше относительное уменьшение длины отрезка на каждой итерации, т.е. при уменьшении δ достигается более высокая скорость сходимости метода дихотомии;

б) при чрезмерно малом δ сравнение значений $f(x)$ в точках x_1 и x_2 , отличающихся на величину δ , становится затруднительным. Поэтому выбор δ должен быть согласован с точностью определения $f(x)$ и с количеством верных десятичных знаков при задании аргумента x .

2) Число итераций метода дихотомии n , необходимое для определения точки x^* с точностью ε , определяется неравенством

$$n \geq \log_2 (b-a-\delta)/(2\varepsilon-\delta).$$

Доказательство этого факта можно найти в [3].

2) Величина δ может быть выбрана достаточно малой, поэтому если пренебречь ею в выражении

$$n \geq \log_2 (b-a-\delta)/(2\varepsilon-\delta), \text{ получим } \varepsilon_n = (b-a)/2^{n+1}.$$

На каждой итерации метода дихотомии вычисляются два значения $f(x)$. Поэтому после N вычислений $f(x)$ производится $n=N/2$ итераций и достигается точность определения x^* :

$$\varepsilon(N) \approx \varepsilon_{N/2} \approx (b-a)/2^{(N+2)/2}.$$

Пример 3. Первый метод дихотомии (деления отрезка пополам).

Решить задачу $f(x) = x^4 + e^{-x} \rightarrow \min$, где $0 \leq x \leq 1$, $\varepsilon = 0,1$.

Решение.

Выберем $\delta = 0,02$.

Итерация 1.

ШАГ 1. $x_1 = 0,49$, $x_2 = 0,51$. $f(x_1) = 0,670$, и $f(x_2) = 0,668$.

ШАГ 2. $f(x_1) > f(x_2)$, поэтому полагаем $a = x_1 = 0,49$.

ШАГ 3. $(b-a)/2 = 0,255 > 0,1$, т.е. переходим к следующей итерации.

Дальнейшие результаты запишем в таблицу 2.

Таблица 2.

Номер итерации	a	b	$(b-a)/2$	x_1	x_2	$f(x_1)$	$f(x_2)$	Сравнение $f(x_1)$ и $f(x_2)$
2	0,49	1	0,26	0,735	0,755	0,771	0,792	$f(x_1) < f(x_2)$
3	0,49	0,755	0,13	0,613	0,633	0,683	0,691	$f(x_1) < f(x_2)$
4	0,49	0,633	0,07					

$0,07 < 0,1$ – точность достигнута.

Таким образом, $x^* \approx (0,49 + 0,633)/2 \approx 0,56$, $f^* \approx 0,67$ (сравните с результатами решения примера 1 и примера 2).

2.3.2. Метод золотого сечения

Рассмотрим такое расположение точек x_1 и x_2 на отрезке $[a; b]$, при котором одна из них становится пробной точкой и на новом отрезке, полученном после исключения части исходного отрезка. Причем точки x_1 и x_2 обладают также следующим свойством: каждая из них делит отрезок на две неравные части так, что отношение длины всего отрезка к длине его большей части равно отношению длин большей и меньшей частей отрезка. То есть отрезок делится в **золотом отношении**, а точки x_1 и x_2 называются **точками золотого сечения** отрезка (рис. 2).

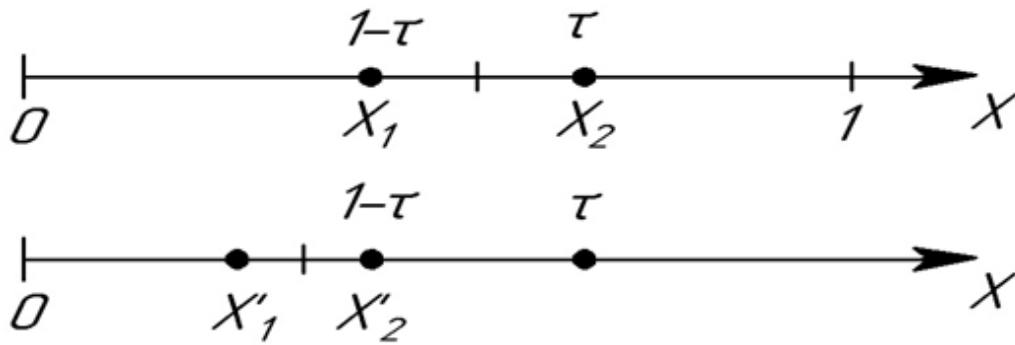


Рис. 2 К определению пробных точек в методе золотого сечения

Для произвольного отрезка $[a; b]$ выражения для x_1 и x_2 имеют вид

$$x_1 = a + (3 - \sqrt{5})(b-a)/2; \quad x_2 = a + (\sqrt{5} - 1)(b-a)/2.$$

В конце вычислений по данному методу в качестве приближенного значения x^* можно взять середину последнего и полученных отрезков $x^* \approx x_{\text{сред}} = (b+a)/2$.

Приведем описание алгоритма метода золотого сечения.

ШАГ 1. Вычислить

$$x_1 = (a + (3 - \sqrt{5})(b-a))/2$$

$$x_2 = (a + (\sqrt{5} - 1)(b-a))/2.$$

Вычислить $f(x_1)$ и $f(x_2)$. Положить $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2$, $\varepsilon_n = (b-a)/2$.

ШАГ 2. Проверка на окончание поиска: если $\varepsilon_n > \varepsilon$, то перейти к шагу 3, иначе – к шагу 4.

ШАГ 3. Переход к новому отрезку и новым пробным точкам.

Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то перейти к отрезку $[a; x_2]$, положив $b = x_2$, $x_2 = x_1$, $f(x_2) = f(x_1)$, $x_1 = b - \tau(b-a)$ и вычислить $f(x_1)$, иначе – положить $a = x_1$,

$x_1 = x_2, f(x_1) = f(x_2), x_2 = a + \tau(b - a)$ и вычислить $f(x_2)$.

Положить $\varepsilon_n = \tau \cdot \varepsilon$ и перейти к шагу 2.

ШАГ 4. Окончание поиска: положить $x^* \approx x_{\text{сред}} = (b+a)/2, f^* \approx f(x_{\text{сред}})$.

Пример 4. Метод золотого сечения.

Решить задачу $f(x) = x^4 + e^{-x} \rightarrow \min$, где $0 \leq x \leq 1, \varepsilon = 0,1$.

Итерация 1.

ШАГ 1. $x_1 = 0,382, x_2 = 0,618, f(x_1) = 0,704$, и $f(x_2) = 0,685, \varepsilon_n = 0,5$.

ШАГ 2. $\varepsilon_n = 0,5 > \varepsilon = 0,1$, поэтому переходим к шагу 3.

ШАГ 3. $f(x_1) > f(x_2)$, поэтому полагаем $a = x_1 = 0,382, x_1 = 0,618, f(x_1) = 0,685, x_2 = 0,764, \varepsilon_n = 0,309$ и вычисляем $f(x_2) = 0,807$. Переходим к следующей итерации, начиная с шага 2.

Дальнейшие результаты запишем в таблицу 3.

Таблица 3.

Номер итерации	a	b	ε_n	x_1	x_2	$f(x_1)$	$f(x_2)$	Сравнение $f(x_1)$ и $f(x_2)$
2	0,382	1,000	0,309	0,618	0,764	0,685	0,807	$f(x_1) < f(x_2)$
3	0,382	0,764	0,191	0,528	0,618	0,668	0,685	$f(x_1) < f(x_2)$
4	0,382	0,618	0,118	0,472	0,528	0,673	0,668	$f(x_1) > f(x_2)$
5	0,472	0,618	0,073	0,073				

$0,073 < 0,1$ – точность достигнута.

Таким образом, $x^* \approx (0,472+0,618)/2 \approx 0,55, f^* \approx 0,67$ (сравните с результатами решения примеров 1-3).

2.3.3. Второй метод дихотомии (деления отрезка пополам)

Второй метод дихотомии использует на каждой итерации три пробные точки и обеспечивает последовательное уменьшение отрезка, содержащего x^* , ровно вдвое.

Разделим отрезок $[a; b]$ на четыре равные части пробными точками $x_i = a + i(b-a)/4$, $i = 1, 2, 3$. Сравним значения $f(x_1)$ и $f(x_2)$. Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то уменьшенный вдвое отрезок поиска точки найден x^* - это $[a; x_2]$. Если же $f(x_1) > f(x_2)$, то произведем еще одно сравнение значений $f(x)$: при $f(x_2) \leq f(x_3)$ перейдем к отрезку $[x_1; x_3]$, а в противном случае – к отрезку $[x_2; b]$.

Отметим, что каким бы ни оказался новый отрезок, одна из уже использованных пробных точек переходит на его середину, становясь новой точкой x_2 . Таким образом, для проведения следующей итерации на вновь полученном отрезке потребуется вычисление не более двух новых значений $f(x)$ (либо только в точке x_1 , либо еще и в точке x_3).

Описание алгоритм второго метода деления отрезка пополам.

ШАГ 1. Положить $x_2 = (a+b)/2$. Вычислить $f(x_2)$ и перейти к шагу 2.

ШАГ 2. Положить $x_1 = (a+x_2)/2$. Вычислить $f(x_1)$ и перейти к шагу 3.

ШАГ 3. Сравнить $f(x_1)$ и $f(x_2)$. Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то перейти к отрезку $[a; x_2]$, положив $b = x_2$, $x_2 = x_1$, $f(x_2) = f(x_1)$, и перейти к шагу 5, иначе – положить $x_3 = (x_2+b)/2$, вычислить $f(x_3)$ и перейти к шагу 4.

ШАГ 4. Сравнить $f(x_2)$ и $f(x_3)$. Если $f(x_2) \leq f(x_3)$, то перейти к отрезку $[x_1; x_3]$, положив $a = x_1$, $b = x_3$, иначе – продолжить поиск на отрезке $[x_2; b]$,

положив $a = x_2$, $x_2 = x_3$, $f(x_2) = f(x_3)$. Перейти к шагу 5.

ШАГ5. Проверка на окончание поиска. Вычислить $\varepsilon_n = (b-a)/2$ и сравнить с ε . Если $\varepsilon_n > \varepsilon$, то перейти к следующей итерации, вернувшись к шагу 2, иначе - завершить поиск x^* , положив $x^* \approx x_2$, $f^* \approx f(x_2)$.

Отметим, что на первой итерации данного метода деления отрезка пополам вычисляется не более трех значений $f(x)$, а на остальных – не более двух. Поэтому N вычислений $f(x)$ гарантируют осуществление $(N-1)/2$ итераций, и достигнутая точность определения x^* составляет

$$\varepsilon(N) = (b-a)/(2^{(N-1)/2+1}).$$

Пример 3. Второй метод дихотомии (деления отрезка пополам).

Решить задачу $f(x) = x^4 + e^{-x} \rightarrow \min$, где $0 \leq x \leq 1$, $\varepsilon = 0,1$.

Решение.

Итерация 1.

ШАГ 1. Находим $x_2 = 0,5$, $f(x_2) = 0,669$. Переходим к шагу 2.

ШАГ 2. Определяем $x_1 = 0,25$, $f(x_1) = 0,783$. Переходим к шагу 3.

ШАГ 3. $f(x_1) > f(x_2)$, поэтому полагаем $x_3 = 0,75$, $f(x_3) = 0,789$ и переходим к шагу 4.

ШАГ 4. $f(x_2) < f(x_3)$, поэтому полагаем $a = 0,25$, $b = 0,75$ и переходим к шагу 5.

ШАГ5. Находим $\varepsilon_n = 0,25 > 0,1$, поэтому переходим к следующей итерации, начиная с шага 2.

Дальнейшие результаты запишем в таблицу 4.

Таблица 4.

Номер итерации	a	b	ε_n	x_1	x_2	x_3	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	Сравнение $f(x_1)$ и $f(x_2)$
2	0,250	0,750	0,25	0,375	0,5	0,625	0,707	0,669	0,688	$f(x_1) > f(x_2)$ $f(x_2) < f(x_3)$
3	0,375	0,625	0,13	0,438	0,5	0,563	0,669	0,669	0,670	$f(x_1) > f(x_2)$ $f(x_2) < f(x_3)$
4	0,438	0,563	0,06							

$0,06 < 0,1$ – точность достигнута.

Таким образом, $x^* \approx x_2 = 0,5, f^* \approx f(x_2) = 0,67$ (сравните с результатами решения примеров предыдущими способами).

3. Методы, использующие производные функции

Рассмотренные ранее прямые методы используются при минимальных требованиях к целевой функции $f(x)$ – она считается унимодальной, и вычислению подлежат значения только самой функции, но не ее производных. Если усилить эти требования, предположив, что $f(x)$ является дифференцируемой или дважды дифференцируемой выпуклой функцией, и считать, что возможно вычисление производных $f'(x)$ в произвольно выбранных точках, то эффективность процедур поиска точки минимума можно существенно повысить.

Рассмотрим методы, в которых используются значения производных целевой функции. Как известно, для выпуклой дифференцируемой функции равенство $f'(x) = 0$ является не только необходимым, но и достаточным условием глобального минимума. Поэтому, если известно, что x^* является внутренней точкой отрезка $[a; b]$, то приближенное равенство $f'(x) \approx 0$ или $|f'(x)| \leq \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ – достаточно малое число, может служить условием остановки вычислений в рассматриваемых далее методах.

3.1.Метод средней точки

Если определение значений производной $f'(x)$ не представляет затруднений, то в процедуре исключения отрезков в методе деления отрезка пополам вычисление двух значений вблизи середины очередного отрезка можно заменить вычислением одного значения $f'(x)$ в его средней точке $x_{\text{сред}} = (b+a)/2$.

В самом деле, если $f'(x) > 0$, то точка $x_{\text{сред}}$ лежит на участке монотонного возрастания $f(x)$, поэтому $x^* < x_{\text{сред}}$, и точку минимума следует искать на отрезке $[a; x_{\text{сред}}]$. При $f'(x) < 0$ имеем противоположную ситуацию и переходим к отрезку $[x_{\text{сред}}; b]$. Равенство $f'(x) = 0$ означает, что точка минимума найдена точно: $x^* = x_{\text{сред}}$ (рис. 3).

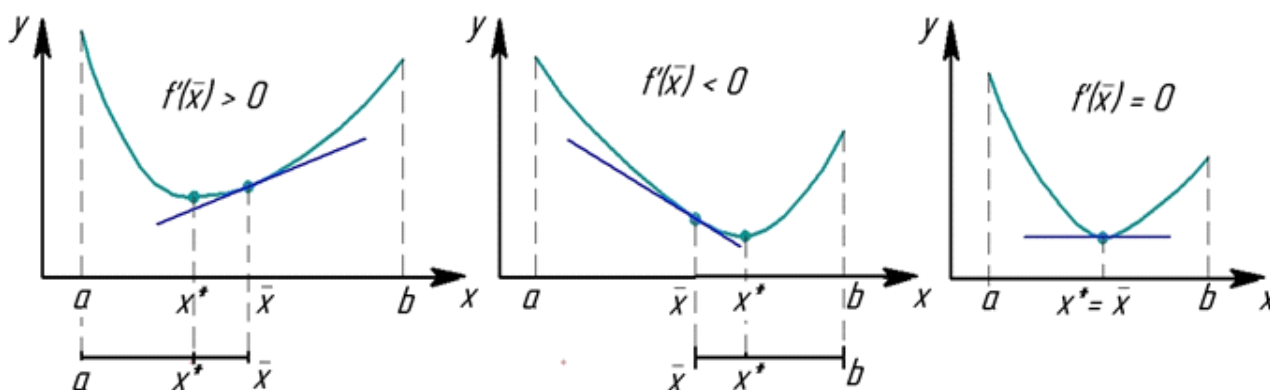


Рис. 3 Исключение отрезков методом средней точки

Такое исключение отрезков требует на каждой итерации только одного вычисления $f'(x)$ и уменьшает отрезок поиска точки x^* ровно вдвое.

Приведем описание алгоритма метода средней точки.

ШАГ 1. Положить $x^* \approx x_{\text{сред}} = (b+a)/2$, вычислить $f'(x_{\text{сред}})$.

ШАГ 2. Проверка на окончание поиска: если $|f'(x_{\text{сред}})| \leq \varepsilon$, то положить

$x^* \approx x_{\text{сред}}, f^* \approx f(x_{\text{сред}})$ и завершить поиск, иначе – перейти к шагу 3.

ШАГ3 . Сравнить $f'(x_{\text{сред}})$ с нулем. Если $f'(x_{\text{сред}}) > 0$, то продолжить поиск на отрезке $[a; x_{\text{сред}}]$, положив $b = x_{\text{сред}}$, иначе – перейти к отрезку $[x_{\text{сред}}; b]$, положив $a = x_{\text{сред}}$. Перейти к шагу 1.

Пример 5. Метод средней точки.

Решить задачу $f(x) = x^4 + e^{-x} \rightarrow \min$, где $0 \leq x \leq 1$, с точностью $|f'(x)| < 0,02$.

Итерация 1.

ШАГ 1. Находим $x_{\text{сред}} = 0,5$, $f'(x_{\text{сред}}) = -0,107$. Переходим к шагу 2.

ШАГ 2. $|f'(x)| > 0,02$, поэтому переходим к шагу 3.

ШАГ 3. $f'(x_{\text{сред}}) < 0$, значит полагаем $a = x_{\text{сред}} = 0,5$ и переходим к следующей итерации, начиная с шага 1. Дальнейшие результаты запишем в таблицу 5.

Таблица 5.

Номер итерации	a	b	$x_{\text{сред}}$	Значение и знак $f'(x_{\text{сред}})$
2	0,5	1	0,750	1,215 +
3	0,5	0,750	0,625	0,441 +
4	0,5	0,625	0,563	0,142 +
5	0,5	0,563	0,531	0,012 точность достигнута

Таким образом, $x^* \approx 0,531, f^* \approx 0,668$.

3.2.Метод хорд

Как уже отмечалось, равенство $f'(x) = 0$ является необходимым и достаточным условием глобального минимума выпуклой дифференцируемой функции $f(x)$. Поэтому если на концах отрезка $[a; b]$ производная $f'(x)$ имеет разные знаки, т.е. $f'(a) f'(b) < 0$, то на интервале $(a; b)$ найдется точка, в которой $f'(x)$ обращается в нуль, и поиск точки минимума $f(x)$ на $[a; b]$ эквивалентен решению уравнения

$$f'(x) = 0 \text{ на интервале } (a; b).$$

Отсюда следует, что при $f'(a) \cdot f'(b) < 0$ любой приближенный метод решения уравнения $f'(x) = 0$ можно рассматривать как метод минимизации выпуклой дифференцируемой функции $f(x)$ на отрезке $[a; b]$ (рис. 4).

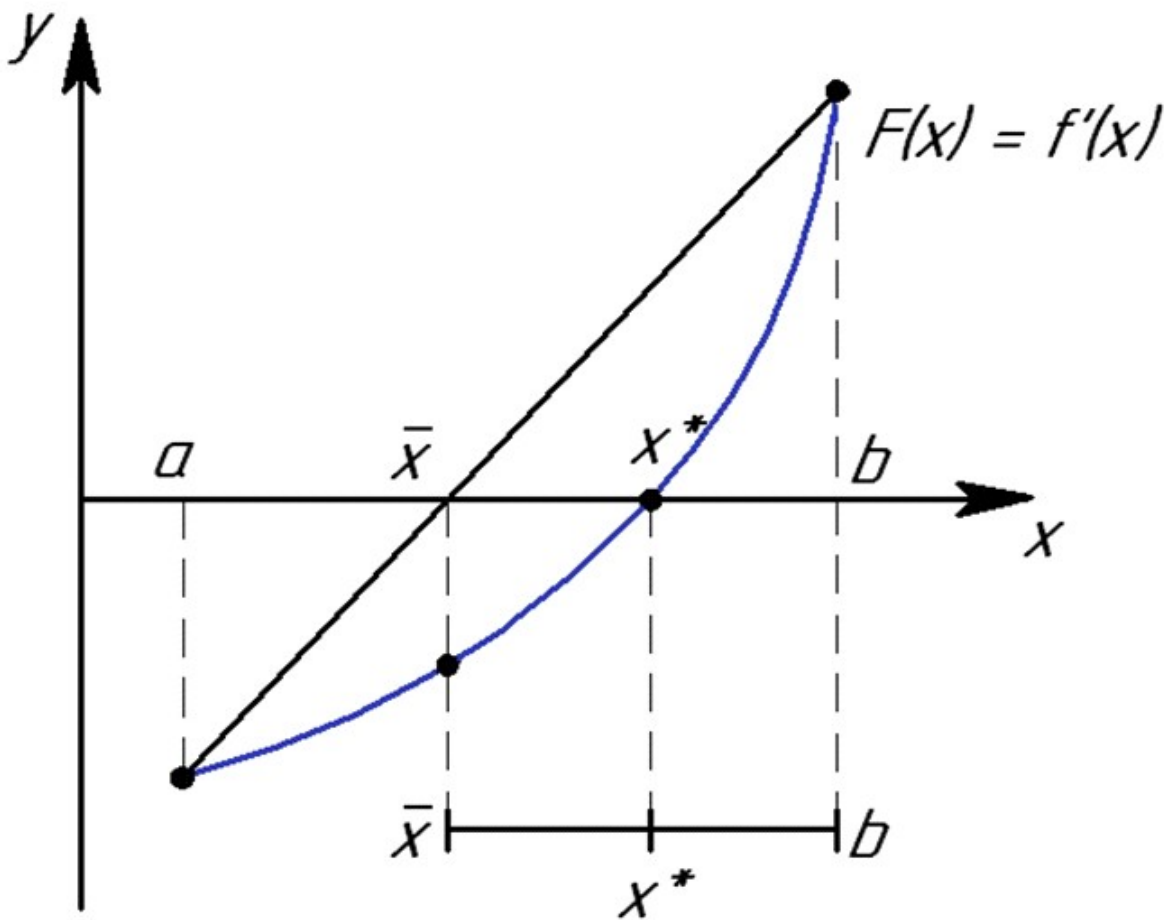


Рис. 4 Исключение отрезков методом хорд

В курсе математического анализа рассматривается *метод хорд* приближенного решения уравнения $F(x)=0$ на отрезке при $[a; b]$ при $F(a)F(b)<0$. Этот метод основан на исключении отрезков путем определения точки x_0 пересечения с осью Ox хорды графика функции $F(x)$ на очередном отрезке.

Полагая $F(x)=f'(x)$, записываем координату точки x_0 :

$$x_0 = a - (f'(a) \cdot (a-b)) / (f'(a) - f'(b)).$$

Отрезок дальнейшего поиска точки x^* ($[a; x_0]$ или $[x_0; b]$) выбирается в зависимости от знака $f'(x_0)$ так же, как в методе средней точки. На каждой итерации, кроме первой, следует вычислять одно новое значение $f'(x)$.

Приведем описание алгоритма метода хорд.

ШАГ 1. Найти x_0

$$x_0 = a - (f'(a) \cdot (a-b)) / (f'(a) - f'(b)).$$

Вычислить $f'(x_0)$. Перейти к шагу 2.

ШАГ2. Проверка на окончание поиска: если $|f'(x_0)| \leq \varepsilon$, то положить $x^* \approx x_0, f^* \approx f(x_0)$ и завершить поиск, иначе – перейти к шагу 3.

ШАГ3. Переход к новому отрезку. Если $f'(x_0) > 0$, то продолжить поиск на отрезке $[a; x_0]$, положив $b = x_0, f'(b) = f'(x_0)$, иначе – перейти к отрезку $[x_0; b]$, положив $a = x_0, f'(a) = f'(x_0)$. Перейти к шагу 1.

Пример 6. Метод хорд.

Решить задачу $f(x) = x^4 + e^{-x} \rightarrow \min$, где $0 \leq x \leq 1$, с точностью

$$|f'(x_0)| < 0,05.$$

Итерация 1.

ШАГ 1. Находим $x_0 = 0,216$, $f'(x_0) = -0,766$. Переходим к шагу 2.

ШАГ 2. $|f'(x_0)| > 0,05$, поэтому переходим к шагу 3.

ШАГ 3. $f'(x_0) < 0$, значит, полагаем $a = x_0 = 0,216$, $f'(a) = -0,766$ и переходим к следующей итерации.

Дальнейшие результаты запишем в таблицу 6.

Таблица 6.

Номер итерации	a	b	x_0	Значение и знак $f'(x_0)$
2	0,216	1	0,352	-0,528
3	0,352	1	0,435	-0,319
4	0,435	1	0,480	-0,175
5	0,480	1	0,504	-0,091
6	0,504	1	0,516	-0,046 точность достигнута

Таким образом, $x^* \approx 0,516$, $f^* \approx 0,668$.

Замечание. До сих пор предполагалось, что $f'(a)f'(b) < 0$, т.е. производная на концах отрезка имеет разные знаки. При нарушении этого условия точку можно указать сразу. Так, если $f'(a) > 0$, $f'(b) > 0$, то $f(x)$ возрастает на $[a; b]$, следовательно, $x^* = a$, а при $f'(a) < 0$, $f'(b) < 0$ она убывает и $x^* = b$. В случае $f'(a)f'(b) = 0$ $x^* = a$ или $x^* = b$, в зависимости от того, на каком из концов отрезка $[a; b]$ $f'(x) = 0$.

3.3.Метод Ньютона

Предположим, что $f(x)$ – дважды дифференцируемая функция, причем $f''(x) > 0$ (напомним, что это гарантирует выпуклость $f(x)$). Тогда корень уравнения $f'(x)=0$ можно искать приближенно, используя *метод касательных*. Этот метод решения уравнения $F(x)=0$ состоит в построении последовательных приближений $x_k, k=0,1,\dots$ следующим образом. В очередной точке x_k строится линейная аппроксимация функции $F(x)$ (касательная к графику $F(x)$) и точка, в которой аппроксимирующая функция обращается в нуль, используется в качестве следующего приближения x_{k+1} . (Рис. 5).

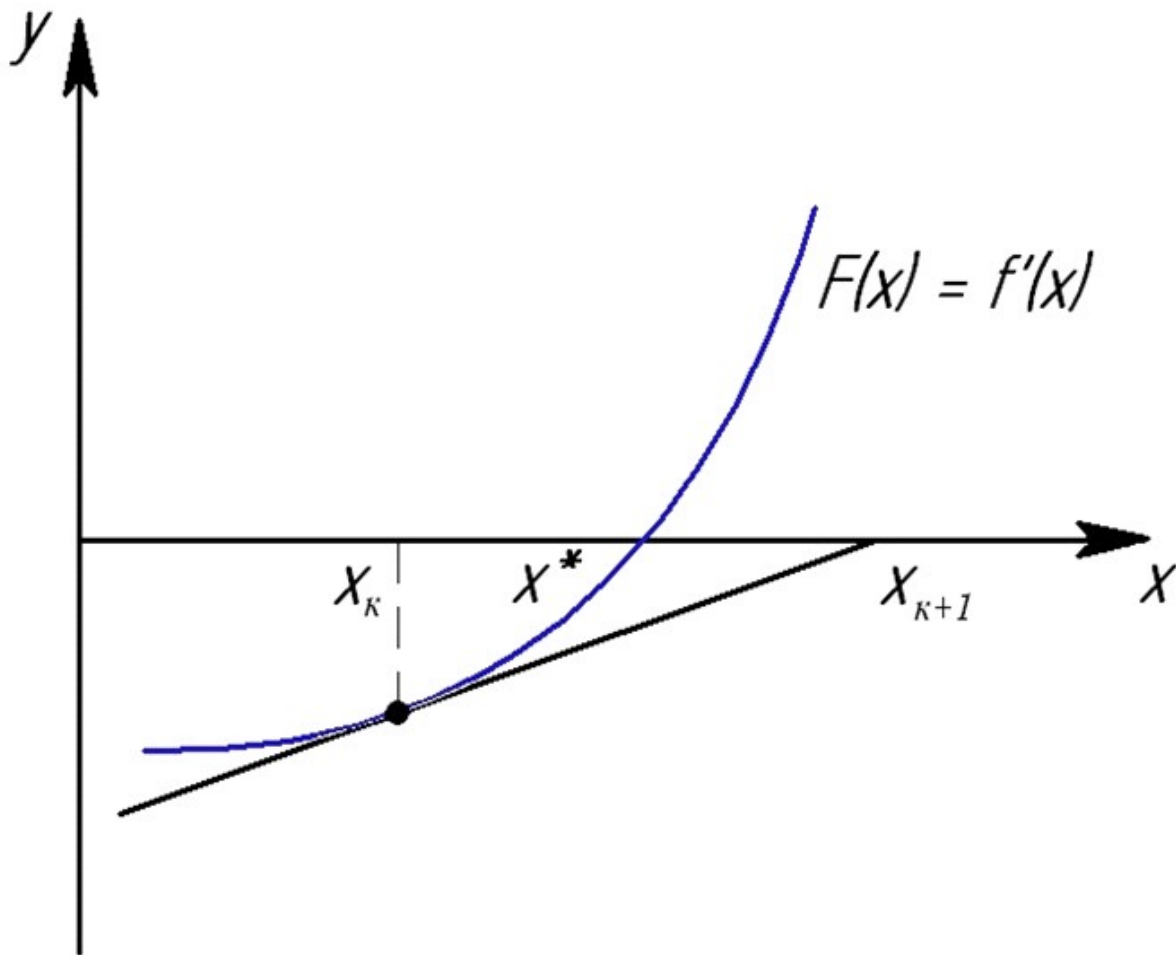


Рис. 5 Иллюстрация к методу касательных

Уравнение касательной к графику $F(x)$ в точке $x = x_k$ имеет вид

$$y = F(x_k) + F'(x_k)(x - x_k),$$

поэтому точка $x = x_{k+1}$, найденная из условия $y=0$, определяется формулой $x_{k+1} = x_k - f'(x_k)/f''(x_k)$, где $k=0,1,\dots$, и x_0 – точка, выбранная в качестве начального приближения. Вычисления производят до тех пор, пока не выполнится неравенство $|f'(x_k)| < \epsilon$, после чего полагают $x^* \approx x_k$. Такая процедура поиска точки минимума называется *методом Ньютона*.

Пример 7. Метод Ньютона (метод касательных).

Найти точку минимума функции $f(x) = x \operatorname{arctg} x - 0,5 \ln(1+x^2)$ с точностью $|f'(x)| < 10^{-7}$.

Решение.

Функция $f(x)$ дважды дифференцируема, причем $f''(x) = 1/(1+x^2) > 0$. Выберем начальное приближение $x_0 = 1$, построим последовательные приближения по формуле

$$x_{k+1} = x_k - f'(x_k)/f''(x_k), \quad k=0,1,\dots, \text{ и запишем в таблицу 7.}$$

Таблица 7.

k	x_k	$f'(x_k)$
0	1	-0,79
1	-0,57	-0,52
2	0,12	0,12
3	$-1,061 \cdot 10^{-3}$	$-1,061 \cdot 10^{-3}$
4	$9 \cdot 10^{-8}$	$9 \cdot 10^{-8}$

Таким образом, $x^* \approx 9 \cdot 10^{-8} \approx 0$.

4. Задачи для самостоятельного решения

Найти точку минимума и минимум функции $f(x) = -\exp(-x)\ln x + a \cdot x$ на интервале $[0,5; 2,5]$ с точностью $\varepsilon = 0,1; 0,01; 0,001$ в зависимости от параметра a . Применить для решения задачи все рассмотренные методы минимизации функции.

Номер варианта	a
1	0
2	0,01
3	0,02
4	0,03
5	0,04
6	0,05
7	0,06
8	0,07
9	0,08
10	0,09
11	0,1
12	0,11
13	0,12
14	0,13
15	0,14
16	0,15
17	0,16
18	0,17
19	0,18
20	0,19
21	0,2
22	0,21
23	0,22
24	0,23
25	0,24

5. Литература

1. А. В. Аттетков, С.В. Галкин, В.С. Зарубин. Методы оптимизации: Учеб. для вузов/ Под ред. В.С. Зарубина, А. П. Крищенко. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001. – 440 с.
2. Галеев Э.М. Оптимизация: теория, примеры, задачи: Учеб. пособие. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 304 с.
3. Лесин В.В., Лисовец Ю.П. Основы методов оптимизации. – М.: Изд-во МАИ, 1995. – 344 с.
4. Струченков В.И. Методы оптимизации. Основы теории, задачи, обучающие компьютерные программы: Учебное пособие/В.И.Струченков . – М.: Издательство «Экзамен», 2005. -256 с.